第28卷 第1期 工 程 数 学 学 报 Vol. 28 No. 1
2011年02月 CHINESE JOURNAL OF ENGINEERING MATHEMATICS Feb. 2011

文章编号:1005-3085(2011)01-0067-08

无单元Galerkin方法中周期边界条件的处理*

王晓东， 欧阳洁， 苏 进

(西北工业大学应用数学系，西安 710129)

摘 要: 本文研究了无单元Galerkin方法中周期边界条件的处理技术，将Lagrange乘子法用于周期边界条件的处理．数值计算结果表明，该方法具有较高的计算精度．另外，它与无单元Galerkin方法中本质边界条件处理的Lagrange乘子法具有统一性，对于周期、本质混合型边界条件的处理尤为方便．

关键词: 周期边界；无单元Galerkin方法；无网格方法；Lagrange乘子法

分类号: **AMS**(2000) 65M60; 65N30 **中图分类号**: O241.8 **文献标识码**: A

1 引言

一些微分方程的解在整个求解区域内会具有某种周期性，例如：电磁场问题、某些流动问题、聚合物分子的取向分布问题等．针对这类问题，我们可以利用周期性将问题限定在一个周期内进行求解，从而降低问题规模并大大简化计算．如何在限定区域上给定边界条件，将直接关系到微分方程的求解．通常可以给定两种边界条件，一种是自由边界条件，另一种是周期边界条件．当解同时具有某种对称性，并且可以确定对称线或对称面的位置时，可以将求解区域取为两个相邻对称线或对称面之间的区域，并且由于解在对称线或对称面上导数为零，所以可以给定自然边界条件．而当解不具有对称性或无法确定对称线或对称面的位置时，则一般只能给定周期边界条件．

无单元Galerkin (element free galerkin, EFG) 方法[1-3] 作为一种新型的微分方程求解方法，近年来受到很多学者的关注．该方法不依赖于网格或单元，具有易于进行自适应分析、容易构造高阶可导的近似函数、计算精度高等众多优点．由于存在这些优点，EFG方法非常适合求解诸如复杂流体多尺度模拟[4-6] 中具有周期性边界条件的Fokker-Planck方程[7-10] 等问题．它的高精度可以很好地避免Fokker-Planck方程求解过程中由于误差积累导致的取向分布概率密度函数失去守恒性的问题．要实现EFG方法在这类问题中的应用，首先就必须要解决周期边界条件的处理问题．

EFG方法使用移动最小二乘法[1,2] 构造形函数，而移动最小二乘法不具有Kronecker delta函数的性质，所以有限元等方法中周期边界条件的处理方法不能直接用于EFG方法．本文借鉴在EFG方法中使用Lagrange乘子法[11,12] 处理本质边界条件的思想，提出了周期边界条件处理的Lagrange乘子法．该方法精度高，并且与本质边界条件处理的Lagrange乘子法具有统一性，易于实现．

收稿日期: 2009-04-09. **作者简介**: 王晓东 (1986年5月生)，男，硕士. 研究方向：无网格方法及复杂流体数值模拟.
***基金项目**: 国家自然科学基金 (10871159; 10590353)；国家重点基础研究发展计划 (973) 项目 (2005CB321704).

2 EFG 方法的函数逼近

EFG 方法使用移动最小二乘法进行未知函数的逼近和检验函数的构造. 移动最小二乘法[1,2] (moving least squares, MLS) 是局部近似与最小二乘相结合的产物, 该方法直接基于空间离散点来进行近似, 不需要对区域进行网格划分.

在区域 Ω 中, 未知标量函数 $u(x)$ 的移动最小二乘逼近可以表示为

$$u^h(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{m} p_j(\mathbf{x}) a_j(\mathbf{x}) = \mathbf{p}^T(\mathbf{x})\mathbf{a}(\mathbf{x}), \tag{1}$$

其中 h 为节点间的平均距离, $\mathbf{p}^T(\mathbf{x})$ 为基函数向量, m 为基函数个数. 二维空间中, $\mathbf{x} = [x_1, x_2]^T$, 基函数 $\mathbf{p}^T(\mathbf{x})$ 可以取为

$$\begin{aligned} &\text{常数基} \quad \mathbf{p}^T = (1), \\ &\text{线性基} \quad \mathbf{p}^T = (1, x_1, x_2), \\ &\text{二次基} \quad \mathbf{p}^T = (1, x_1, x_2, x_1^2, x_1x_2, x_2^2), \end{aligned}$$

式 (1) 中 $\mathbf{a}(\mathbf{x}) = \{a_1(\mathbf{x}), a_2(\mathbf{x}), \cdots, a_m(\mathbf{x})\}^T$ 是与 $\mathbf{x}$ 有关的未知系数向量, 为了确定 $\mathbf{a}(\mathbf{x})$, 定义上述逼近误差的加权 L_2 范数为

$$R(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{N} w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)\big[\mathbf{p}^T(\mathbf{x}_i)\mathbf{a}(\mathbf{x}) - u_i\big]^2, \tag{2}$$

其中 N 为节点总数, $u_i = u(\mathbf{x}_i)$ 为函数在节点 $\mathbf{x}_i$ 处的函数值, $w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$ 为节点权函数, 一般取为三次样条函数, 即

$$w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) = w(r) = \begin{cases} \frac{2}{3} - 4r^2 + 4r^3, & r \le \frac{1}{2}, \\ \frac{4}{3} - 4r + 4r^2 - \frac{4r^3}{3}, & \frac{1}{2} < r \le 1, \\ 0, & r > 1. \end{cases}$$

为保证 $u^h(\mathbf{x})$ 为最佳近似, 需使 $R(\mathbf{x})$ 达到最小, 即满足

$$\frac{\partial R}{\partial \mathbf{a}} = \mathbf{A}(\mathbf{x})\mathbf{a}(\mathbf{x}) - \mathbf{B}(\mathbf{x})\mathbf{U} = \mathbf{0}, \tag{3}$$

这里

$$\begin{aligned} &\mathbf{A}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{N} w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)\mathbf{p}(\mathbf{x}_i)\mathbf{p}^T(\mathbf{x}_i), \\ &\mathbf{B}(\mathbf{x}) = \big[w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1)\mathbf{p}(\mathbf{x}_1), w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2)\mathbf{p}(\mathbf{x}_2), \cdots, w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_N)\mathbf{p}(\mathbf{x}_N)\big], \\ &\mathbf{U} = \{u_1, u_2, \cdots, u_N\}^T. \end{aligned}$$

从 (3) 式中求得 $\mathbf{a}(\mathbf{x})$ 并代入 (1) 式中, 便可以得到函数 $u(\mathbf{x})$ 的 MLS 逼近为

$$u^h(\mathbf{x}) = \mathbf{p}^T(\mathbf{x})\mathbf{A}^{-1}(\mathbf{x})\mathbf{B}(\mathbf{x})\mathbf{U} = \mathbf{\Phi}^T(\mathbf{x})\mathbf{U}, \tag{4}$$

其中

$$\mathbf{\Phi}^T(\mathbf{x}) = \big[\varphi_1(x), \varphi_2(x), \cdots, \varphi_N(x)\big].$$

3　EFG 方法的方程离散

假设 $\mathcal{L}$ 为定义在区域 Ω 上的任一微分算子，u 为满足一定光滑性要求的未知函数，f 为已知函数，微分方程的一般形式可以写为

$$\mathcal{L}(u) = f, \tag{5}$$

由于 (5) 式在区域 Ω 内任意点都满足，因此对任意函数 v 都有

$$\langle \mathcal{L}(u), v\rangle_\Omega = \langle f, v\rangle_\Omega, \tag{6}$$

其中，函数 v 称为检验函数，$\langle \cdot,\cdot\rangle_\Omega$ 为区域 Ω 上通过函数内积定义的泛函，即

$$\langle g, h\rangle_\Omega = \int_\Omega gh\mathrm{d}\Omega,$$

式 (6) 称为微分方程 (5) 的等效积分形式.

一般地，对于给定的定解条件，方程 (5) 很难精确求解，只能采用数值的办法近似求解. 设 $u^h(\mathbf{x})$ 为满足定解条件的方程 (5) 的一个近似解，称为试探函数，它可以表示为一组已知函数 $\varphi_i(\mathbf{x})$ 的线性组合，即

$$u(\mathbf{x}) \approx u^h(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{N} \varphi_i(\mathbf{x}) u_i, \tag{7}$$

$u_i = u(\mathbf{x}_i)$ 为待定参数. 近似解 $u^h(\mathbf{x})$ 一般不能精确满足微分方程 (5)，试探函数的项数 N 越多，近似解的精度就越高. 当项数 N 趋于无穷大时，近似解将收敛于精确解[13].

如果对任意检验函数 v，(6) 式都成立，此时近似解便为精确解. 实际上，不可能也不需要无穷多个检验函数，而是一般将检验函数取为一组基函数的线性组合，即

$$v = \sum_{i=1}^{M} c_i \phi_i(\mathbf{x}), \tag{8}$$

其中 $M \ge N$. 将 (7), (8) 两式代入 (6) 式，并考虑到系数 c_i 的任意性，得

$$\Big\langle \mathcal{L}\Big(\sum_{i=1}^{N} \varphi_i(\mathbf{x}) u_i \Big), \phi_j(\mathbf{x}) \Big\rangle_\Omega = \big\langle f, \phi_j(\mathbf{x}) \big\rangle_\Omega, \quad j = 1, 2, \cdots, M, \tag{9}$$

上式的意义是通过选择合适的待定参数 u_i，使得微分方程 (5) 在某种平均意义上满足.

对 EFG 方法，$\varphi_i(\mathbf{x})$ 通过 MLS 逼近得到，试探函数与检验函数取自同一函数空间，且 $M = N$，即

$$\phi_j(\mathbf{x}) = \varphi_j(\mathbf{x}), \quad j = 1, 2, \cdots, N,$$

此时 (9) 式具体为

$$\Big\langle \mathcal{L}\Big(\sum_{i=1}^{N} \varphi_i(\mathbf{x}) u_i \Big), \varphi_j(\mathbf{x}) \Big\rangle_\Omega = \big\langle f, \varphi_j(\mathbf{x}) \big\rangle_\Omega, \quad j = 1, 2, \cdots, N, \tag{10}$$

或写成

$$\sum_{i=1}^{N} \big\langle \mathcal{L}(\varphi_i(\mathbf{x})), \varphi_j(\mathbf{x}) \big\rangle_\Omega u_i = \big\langle f, \varphi_j(\mathbf{x}) \big\rangle_\Omega, \quad j = 1, 2, \cdots, N, \tag{11}$$

式 (11) 是以 u_i 为未知量的 N 阶代数方程组.

计算时可以使用分部积分或 Green 公式降低 $\mathcal{L}$ 中所含导数的阶次，从而降低对函数 $u^h(\mathbf{x})$ 的连续性要求. 通过定解条件对代数方程组 (11) 做相应修正后求得 u_i，将 u_i 代入 (7) 式即可得到近似解 $u^h(\mathbf{x})$.

4 周期边界条件的处理

假设微分方程(5)具有如下周期边界条件

$$u(\Gamma_1) = u(\Gamma_2), \tag{12}$$

其中边界Γ_1和Γ_2空间位置不同，但几何形状和几何尺寸相同，例如：两个单点、两条长度相同的线段、两个大小和形状均相同的平面等. Γ_1与Γ_2上的点一一对应，(12)式表示对应点处未知函数取值相同. 由于(12)式在边界Γ_1和Γ_2的所有对应点处满足，并且边界Γ_1和Γ_2的几何形状和几何尺寸相同，因此对任意的λ都有如下的积分形式成立

$$\int_{\Gamma_1} \lambda u \mathrm{d}s - \int_{\Gamma_2} \lambda u \mathrm{d}s = 0, \tag{13}$$

式中λ为Lagrange乘子[11,12].

取检验函数为未知函数u的变分δu时，微分方程对应的等效积分形式(也称Galerkin变分形式)可以写为

$$\delta\Pi(u) = \int_{\Omega} \{\delta u \mathcal{L}(u) - f\delta u\} \mathrm{d}\Omega = 0, \tag{14}$$

将(13)式以变分的形式引入到(14)式中得到

$$\begin{aligned}\delta\Pi_\lambda(u,\lambda) \ =\ & \int_{\Omega} \{\delta u \mathcal{L}(u) - f\delta u\} \mathrm{d}\Omega + \int_{\Gamma_1} \delta\lambda u \mathrm{d}s_1 \\ & + \int_{\Gamma_1} \lambda\delta u \mathrm{d}s_1 - \int_{\Gamma_2} \delta\lambda u \mathrm{d}s_2 - \int_{\Gamma_2} \lambda\delta u \mathrm{d}s_2 = 0,\end{aligned} \tag{15}$$

δu和$\delta\lambda$分别为u和λ对应的变分函数，且$\delta u \in H^1(\Omega)$，$\delta\lambda \in H^0(\Omega)$，其中$H^1(\Omega)$，$H^0(\Omega)$为1阶和0阶的Sobolev空间. 对任意的$\delta u$和$\delta\lambda$，使(15)式恒成立的$u$必然同时满足微分方程(5)和周期边界条件(12). 另外，由于(15)式等价于

$$\int_{\Omega} \{\delta u \mathcal{L}(u) - f\delta u\} \mathrm{d}\Omega + \int_{\Gamma_1} \lambda\delta u \mathrm{d}s_1 - \int_{\Gamma_2} \lambda\delta u \mathrm{d}s_2 = 0, \tag{16}$$

$$\int_{\Gamma_1} \delta\lambda u \mathrm{d}s_1 - \int_{\Gamma_2} \delta\lambda u \mathrm{d}s_2 = 0, \tag{17}$$

所以同时满足(16)和(17)式的u便是微分方程的解.

计算时，u、λ分别采用MLS逼近和Lagrange插值近似[14]，并且选取δu和$\delta\lambda$分别为MLS形函数$\varphi_i(\mathbf{x})$和Lagrange插值基函数$N_i(\mathbf{x})$. 对应的代数方程组形式为

$$\begin{aligned}&\sum_{i=1}^{N} \big\langle \mathcal{L}(\varphi_i(\mathbf{x})), \varphi_j(\mathbf{x}) \big\rangle_{\Omega} u_i \\ &+ \sum_{k=1}^{N_p} \big(\langle N_k(\mathbf{x}), \varphi_j(\mathbf{x}) \rangle_{\Gamma_1-\Gamma_2} \big) \lambda_k = \big\langle f, \varphi_j(\mathbf{x}) \big\rangle_{\Omega}, \quad j = 1,2,\cdots,N,\end{aligned} \tag{18}$$

$$\sum_{i=1}^{N} \big\langle \mathcal{L}(\varphi_i(\mathbf{x})), N_k(\mathbf{x}) \big\rangle_{\Gamma_1-\Gamma_2} u_i = 0, \quad k = 1,2,\cdots,N_p, \tag{19}$$

式中 N_p 为边界 Γ_1 或 Γ_2 上的节点数．(18) 和 (19) 式是以 u_i 和 λ_k 为未知量的 $N+N_p$ 阶代数方程组．求得 u_i 便可得到满足周期边界条件 (12) 的微分方程 (5) 的数值解．

在 (15) 式中，周期边界条件是以弱形式引入的，即周期边界条件是在平均意义下满足的．也可以令边界 Γ_1 与 Γ_2 上所有对应节点满足周期边界条件 (12)，即

$$u^h(\mathbf{x}_{i1}) = u^h(\mathbf{x}_{i2}), \quad \mathbf{x}_{i1} \in \Gamma_1, \quad \mathbf{x}_{i2} \in \Gamma_2, \quad i = 1, 2, \cdots, N_p, \tag{20}$$

在计算过程中，引入 (20) 式等价于在计算 (15) 式中的边界积分时采用节点积分．

5 数值算例

5.1 一维情形

对均质棒状分子聚合物稀溶液，把分子的旋转限定在平面内时，聚合物分子在微观的取向概率分布函数将满足如下的一维 Fokker-Planck 方程[7-10]

$$\frac{\partial\psi(\theta,t)}{\partial t} = \frac{1}{De}\psi_{\theta\theta}(\theta,t) - \partial_\theta\big(C(\kappa,\theta)\psi(\theta,t)\big), \tag{21}$$

给定周期边界条件

$$\psi(0,t) = \psi(2\pi,t), \tag{22}$$

其中 $\psi(\theta,t)$ 为取向分布概率密度函数，$\theta \in [0,2\pi]$ 为构型变量，κ 为宏观流场速度梯度张量，De 为无量纲的 Deborah 数，$C(\kappa,\theta) = \mathbf{u}\times\kappa\cdot\mathbf{u}$ 且 $\mathbf{u} = (\cos(\theta),\sin(\theta))^T$．

在二维剪切流场和单轴拉伸流场两种情形下，κ 分别取

$$\kappa = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad 和 \quad \kappa = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

计算中 Deborah 数取 $De = 10$，初值取 $\psi(\theta,0) = 1/2\pi$，取向空间内均匀布置 101 个节点，每个单元上采用 4 点 Gauss 积分，时间步长取为 0.005．Fokker-Planck 方程的稳态解见图 1．记剪切流场和单轴拉伸流场下的稳态数值解分别为 $\psi_s(\theta,t)$ 和 $\psi_e(\theta,t)$，计算得到

$$\int_0^{2\pi}\psi_s(\theta,t)\mathrm{d}\theta = 1.0 - 3.9\times10^{-13}, \tag{23}$$

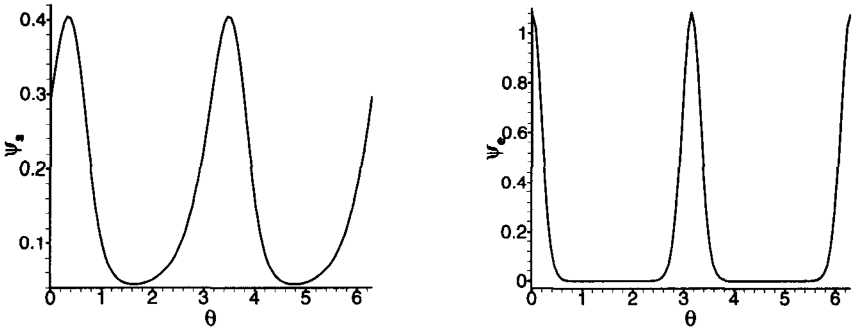
$$\int_0^{2\pi}\psi_e(\theta,t)\mathrm{d}\theta = 1.0 - 7.1\times10^{-13}. \tag{24}$$

为检验计算结果的正确性，图 2 给出了对应迎风格式下的差分解 $\psi'_s(\theta,t)$ 和 $\psi'_e(\theta,t)$，且有

$$\int_0^{2\pi}\psi'_s(\theta,t)\mathrm{d}\theta = 1.00424, \tag{25}$$

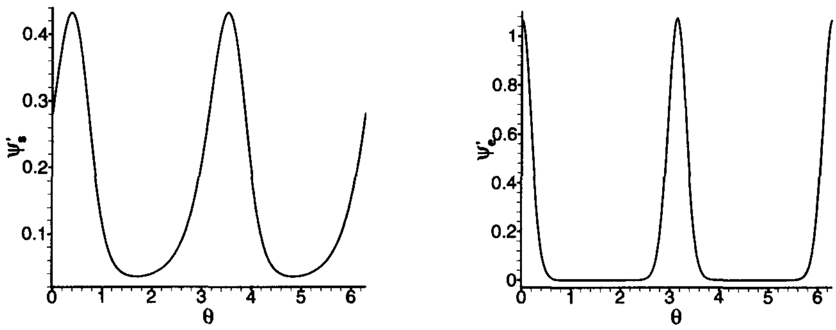
$$\int_0^{2\pi}\psi'_e(\theta,t)\mathrm{d}\theta = 1.013. \tag{26}$$

对比图 1 和图 2 可以发现，EFG 方法的计算结果与差分方法的计算结果吻合．另外从 (23)-(26) 式可以看出，使用 EFG 方法求解时，概率密度函数的归一性可以得到更好的满足．从而说明了本文提出的周期边界条件处理方法不仅可行而且具有较高的计算精度．



(a) 剪切流场下的稳态解　　(b) 拉伸流场下的稳态解

图 1: 无单元 Galerkin 方法求得的 Fokker-Planck 方程的稳态解



(a) 剪切流场下的稳态解　　(b) 拉伸流场下的稳态解

图 2: 差分法求得的 Fokker-Planck 方程的稳态解

5.2 二维情形

考虑如下 Poisson 方程

$$u_{xx} + u_{yy} = -8\pi^2 \sin(2\pi x)\cos(2\pi y), \quad (x,y) \in (0,1)\times(0,1), \tag{27}$$

左右边界上给定 Dirichlet 边界条件

$$u(0,y) = u(1,y) = 0, \quad y \in [0,1], \tag{28}$$

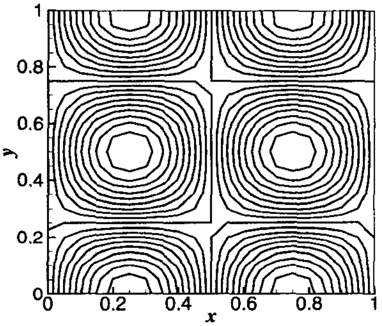
上下边界上给定周期边界条件

$$u(x,1) = u(x,0), \quad x \in [0,1], \tag{29}$$

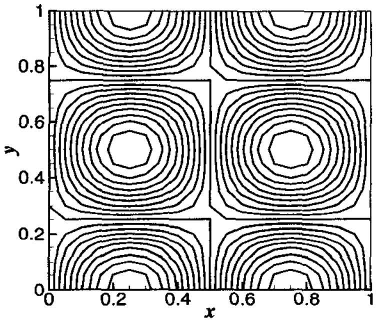
该问题具有解析解

$$u^{\text{exact}} = \sin(2\pi x)\cos(2\pi y), \tag{30}$$

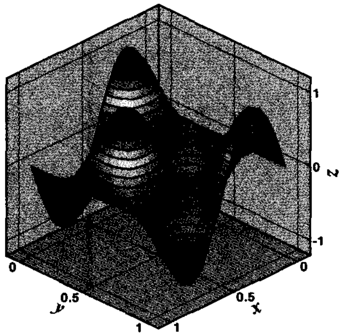
计算时在求解区域 $[0,1]\times[0,1]$ 内均匀地布置 41×41 个节点，背景网格积分采用 4×4 点 Gauss 积分，计算结果见图 3.



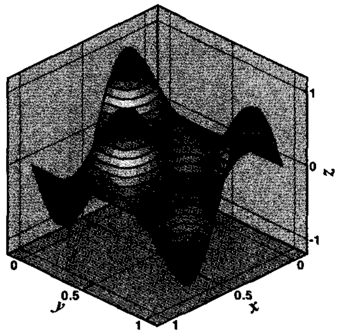
(a) 数值解等值线



(b) 解析解等值线



(c) 数值解



(d) 解析解

图 3: 二维 Poisson 方程求解结果

若记数值解为 u^h，并基于 L_2 范数定义如下误差

$$\varepsilon = \|u^{\text{exact}} - u^h\|_{L_2} = \left[\int_0^1 \int_0^1 (u^{\text{exact}} - u^h)^2 \mathrm{d}x\mathrm{d}y\right]^{\frac{1}{2}}, \tag{31}$$

计算所得误差为 $\varepsilon = 0.00184641$. 计算结果表明本文提出的周期边界条件处理方法对二维问题仍然有效.

6 结束语

本文针对具有周期边界条件的微分方程，提出了 EFG 方法中周期边界条件处理的 Lagrange 乘子法. 该方法将周期边界条件视为约束，写出与之等价的积分形式，然后使用 Lagrange 乘子法将其引入到 Galerkin 变分方程中，从而使周期边界条件在积分平均意义下得到满足. 对一维 Fokker-Planck 方程和二维 Poisson 方程的求解，验证了该方法的可行性. 并且数值计算结果表明：该方法具有较高的计算精度，在周期性问题的求解中保留了无单元 Galerkin 方法高精度的优点.

参考文献：

[1] Zhang Z, Zhao P, Liew K M. Improved element-free Galerkin method for two-dimensional potential problems[J]. Engineering Analysis with Boundary Elements, 2009, 33: 547-554

[2] Nguyen V P, *et al.* Meshless methods: a review and computer implementation aspects[J]. Mathematics and Computers in Simulation, 2008, 79: 763-813

[3] Liu G R, Gu Y T. An Introduction to Meshfree Method and Their Programming[M]. Berlin: Springer, 2005

[4] Zeng Q H, Yu A B, Lu G Q. Multiscale modeling and simulation of polymer nanocomposites[J]. Progress in Polymer Science, 2008, 33: 191-269

[5] Korvink J G, Greiner A, Liu Z. Multiphysics and multiscale simulation[J]. Comprehensive Microsystems, 2008, 18: 539-557

[6] Helzel C, Otto F. Multiscale simulations for suspensions of rod-like molecules[J]. Journal of Computational Physics, 2006, 216: 52-75

[7] Chen S, *et al.* Finite difference approximations for the fractional Fokker-Planck equation[J]. Applied Mathematical Modelling, 2009, 33: 256-273

[8] Doi M, Edwards S F. The Theory of Polymer Dynamics[M]. Oxford: Oxford University Press, 1986

[9] Doi M. Molecular dynamics and rheological properties of concentrated solutions of rodlike polymers in isotropic and liquid crystalline phases[J]. Journal of Polymer Science Polymer Physics Edition, 1981, 19: 229-243

[10] Hess S Z. Fokker-Planck-equation approach to flow alignment in liquid crystals[J]. Zeitschrift für Naturforschung Teil A, 1976, 31: 1034-1037

[11] Fernández-Méndez S, Huerta A. Imposing essential boundary conditions in mesh-free methods[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2004, 193: 1257-1275

[12] Belytschko T, Lu Y Y, Gu L. Element-free Galerkin methods[J]. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 1994, 37: 229-256

[13] 张雄，刘岩. 无网格方法[M]. 北京：清华大学出版社，2004
Zhang X, Liu Y. Meshfree Methods[M]. Beijing: Tsinghua University Press, 2004

[14] Reddy J N. An Introduction to the Finite Element Method[M]. New York: McGraw-Hill, 1993

Imposing Periodic Boundary Conditions in Element Free Galerkin Methods

WANG Xiao-dong, OUYANG Jie, SU Jin

(Department of Applied Mathematics, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710129)

Abstract: In this paper, the Lagrange multiplier method has been used to impose periodic boundary conditions in the element free Galerkin method. Numerical results indicate that the method maintains the high accuracy property of the element free Galerkin method in periodic problems. In addition, based on the similarity between the method used in this paper for periodic boundary conditions and the Lagrange multiplier method for essential boundary conditions, it is convenient to impose periodic-essential mixed boundary conditions.

Keywords: periodic boundary conditions; element free Galerkin method; meshfree method; Lagrange multiplier method

Received: 09 Apr 2009. **Accepted:** 22 Oct 2009.

Foundation item: The National Natural Science Foundation of China (10871159; 10590353); the State Key Development Program for Basic Research of China (2005CB321704).